

УДК 519.6: 621.382

Г.М. Заяц<sup>1</sup>, В.И. Стецюренко<sup>2</sup>, В.А. Цурко<sup>1</sup>

## АЛГОРИТМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ АКТИВНЫХ ОБЛАСТЕЙ ЭЛЕМЕНТОВ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ НА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

*Рассматривается модель создания активных областей элементов интегральных схем посредством термической диффузии примесей в полупроводниках. Модель учитывает нелинейность, многомерность процесса, влияние на диффузию точечных дефектов, кластерообразование, миграцию электронов. Предлагаются алгоритмы численного решения системы дифференциальных уравнений, которые основаны на применении специализированных конечно-разностных методов и эффективны при программной реализации на параллельных вычислительных системах.*

### Введение

В современных технологиях создания локальных легированных областей элементов кремниевых микросхем и полупроводниковых приборов важное значение имеют методы ионной имплантации и термической разгонки примесных атомов. Существенной особенностью имплантации является создание большого количества неравновесных радиационных дефектов, неоднородно распределенных по объему полупроводника. Окончательное распределение активных примесей в полупроводниковых структурах формируется в результате процессов термической твердофазной диффузии и удаления радиационных дефектов. Прогресс микроэлектроники во многом обусловлен разработкой эффективных средств математического моделирования данных технологических процессов.

В настоящее время для создания активных областей современных интегральных микросхем используется низкоэнергетическая ионная имплантация. Сочетание такого рода имплантации (с энергиями  $\sim 10$  кэВ) и быстрого термического отжига позволяет получить легированные области с глубиной  $\sim 100$  нм [1–3], что значительно повышает плотность упаковки ультрабольших интегральных схем.

При изготовлении приборов со сверхмелкими переходами необходимы точные данные о распределениях введенных примесных атомов. Для исследования этих распределений важны применение моделей с высокой степенью адекватности, а также использование и реализация в программных комплексах соответствующих эффективных численных методов. Заметим, что применение для моделирования вышеприведенных современных технологических процессов наиболее распространенной программы SUPREM не всегда позволяет получить достаточно точные результаты. У поверхности полупроводника расчетные данные, полученные при использовании программы SUPREM, могут существенно отличаться от экспериментальных результатов [4, 5]. В то же время точная информация о распределении ионов на всех участках области моделирования необходима для эффективного расчета электрических характеристик полупроводниковых приборов.

В настоящей работе строятся численные методы для модели термической диффузии примесей в полупроводниках с учетом нелинейности, многомерности процесса, влияния на диффузию точечных дефектов, кластерообразования, миграции электронов. При этом, в отличие от общепринятых моделей диффузии примесей [6–8], полагаем, что кластеризация зависит не только от уровня концентрации примесей, но и от концентрации электронов. Этот подход позволяет достаточно точно моделировать распределение примесей у поверхности полупроводникового кристалла при низкоэнергетической имплантации и коротком термическом отжиге структуры. Результаты некоторых расчетов для такого рода моделей в сравнении с экспериментальными данными приведены в статьях [9, 10].

Повышение уровня кинетических моделей диффузии усложняет расчетные алгоритмы и соответствующее программное обеспечение. В то же время конкурентоспособность средств моделирования технологии производства интегральных схем возможна лишь при их высокой производительности, которая может быть обеспечена разработкой соответствующих численных методов, эффективно реализуемых на параллельных вычислительных системах.

Построенные в данной работе численные алгоритмы ориентированы на программные средства для многопроцессорных вычислительных комплексов. В условиях необходимости проведения многовариантных расчетов, сложности кинетических моделей, высокого уровня конкурентоспособности на рынке производства микросхем фактор скорости вычислений имеет существенное значение.

### 1. Постановка задачи

Рассмотрим задачу моделирования донорной либо акцепторной примеси в результате имплантации и термического отжига полупроводниковой пластины в следующей постановке:

– уравнение диффузии примесных атомов имеет вид [11]

$$\frac{\partial C^T}{\partial t} = \sum_{k=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \left( D(\chi) \frac{\partial(\tilde{C}C)}{\partial x_k} + \frac{\tilde{C}C}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial x_k} \right) \right); \quad (1)$$

– уравнение, описывающее перенос дефектов рассмотрим в виде [8]

$$\sum_{k=1}^2 \left( \frac{\partial}{\partial x_k} d(\chi) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_k} + \psi_1(x_1, x_2) \tilde{C} \right) - \psi_2(\chi) \tilde{C} + \psi_3(x_1, x_2) = 0. \quad (2)$$

Здесь  $\chi$  – общая концентрация электронов, нормализованная к собственной концентрации электронов;  $n_e$  определяется соотношением [9, 10]

$$\chi = n/n_e = \frac{C - C^{AC} - C^B + \sqrt{(C - C^{AC} - C^B)^2 + 4n_e^2}}{2n_e}. \quad (3)$$

Величина  $n_e$  зависит от температуры разогрева полупроводникового кристалла. Например, собственная концентрация электронов мышьяка может быть представлена соотношением из работы [12].

Система уравнений (1)–(3) описывает модель термической диффузии примесей при термическом отжиге полупроводниковых структур. В уравнениях (1)–(3) приняты следующие обозначения:  $C$  – концентрация атомов примеси в положении замещения;  $C^T$  – общая концентрация примесных атомов,  $C^T = C + C^{AC}$ ;  $C^{AC}$  – концентрация примесей, связанных в кластеры,  $C^{AC} = K\chi^{p_1} C^{p_2}$ , где  $K$  – характерный параметр кластеризации;  $p_1, p_2 \geq 0$  – параметры, зависящие от вида примеси;  $D = D(\chi)$  – эффективный коэффициент диффузии атомов примеси в поле внутренних упругих напряжений по механизму образования вакансионно-примесных комплексов;  $\tilde{C}$  – эффективная концентрация дефектов;  $C^B$  – суммарная концентрация примеси противоположного типа (предполагаем, что значение концентрации  $C^B = const$  невелико и в процессе термического отжига меняется незначительно);  $d(\chi)$  – коэффициент диффузии дефектов;  $\psi_1(x_1, x_2)$  – функция, зависящая от эффективной скорости дрейфа дефектов в поле внутренних упругих напряжений;  $\psi_2(\chi) > 0$  – величина, зависящая от средней длины диффузионного пробега дефектов и их среднего времени жизни;  $\psi_3(x_1, x_2)$  – функция, зависящая от скорости генерации дефектов.

Областью моделирования  $G$  (рис. 1) является плоский срез подложки перпендикулярно ее поверхности:  $G = \{0 \leq x_1 \leq l_{x_1}, 0 \leq x_2 \leq l_{x_2}\}$  – прямоугольник со сторонами  $l_{x_1}$  и  $l_{x_2}$ ;  $\Gamma$  – граница области моделирования,  $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4$ .

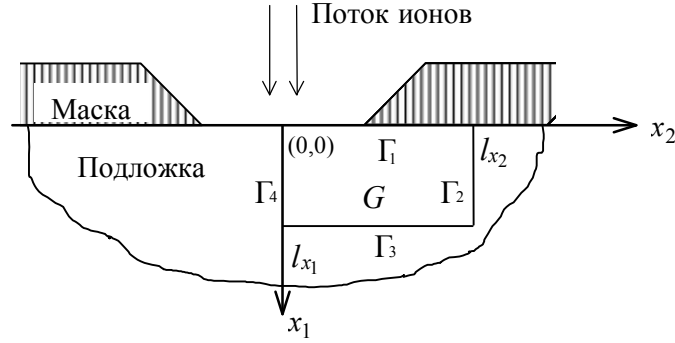


Рис. 1. Область моделирования термической разгонки примеси

Для уравнения (1) на границе  $\Gamma$  рассмотрим условие непротекания

$$D(\chi) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \mathbf{n}} + \frac{\tilde{C}}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad (4)$$

где  $\mathbf{n}$  – вектор нормали к границе моделирования.

Начальные условия имеют вид

$$C^T(x_1, x_2, t) \Big|_{t=0} = C_0(x_1, x_2), \quad (5)$$

где значения  $C_0(x_1, x_2)$  задаются имплантационным распределением.

Уравнение (2) замыкаем на границе  $\Gamma$  условием общего вида

$$\alpha_1 \left( d(\chi) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \mathbf{n}} + \psi_1(x_1, x_2) \tilde{C} \right) + \alpha_2 \tilde{C} = \alpha_3, \quad (6)$$

где  $\alpha_1$  принимает значение 0 либо 1,  $\alpha_2$  и  $\alpha_3$  – функции, в общем случае зависящие от  $t$  и значений  $x_1, x_2$  на границе области моделирования  $\Gamma$ .

## 2. Численный метод

Численное решение системы уравнений (1)–(6) основано на разностном методе [13]. Для эффективного применения многопроцессорных процедур воспользуемся локально-одномерным методом в целых шагах [13].

$$\text{Введем временную сетку: } \omega_\tau = \left\{ t_0 = 0, t_j = \sum_{k=1}^j \tau_k, j = 1, 2, \dots, j_0, \tau_k > 0 \right\}.$$

Шаг по времени  $\tau_j = t_j - t_{j-1}$  выбирается монотонно возрастающим. Можно, например, положить  $\tau_j = 2\tau_{\max} \arctg(\delta t_{j-1}) / \pi$ , где  $\tau_{\max}$  – максимально допустимая величина шага,  $\delta$  – параметр, регулирующий скорость роста  $\tau_j$  [11].

Неравномерная расчетная сетка по пространственным переменным имеет вид

$$\omega_h = \{0 \leq x_{1,i_1} \leq l_{x_1}, 0 \leq x_{2,i_2} \leq l_{x_2}, x_{1,0} = x_{2,0} = 0, x_{\beta,i_2} = \sum_{i_\beta=1}^{N_\beta} h_{\beta,i_\beta}, h_{\beta,i_\beta} = x_{\beta,i_\beta} - x_{\beta,i_\beta-1}, \\ i_\beta = 1, 2, \dots, N_\beta, \beta = 1, 2\}.$$

Численное решение уравнения (1) основано на методе, предложенном в работе [11]. Уравнению (1) поставим в соответствие цепочку одномерных уравнений:

$$\frac{\partial C_{(1)}^T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left( D(\chi_{(1)}) \frac{\partial(\tilde{C}_{(1)}C_{(1)})}{\partial x_1} + \frac{\tilde{C}_{(1)}C_{(1)}}{\chi_{(1)}} \frac{\partial \chi_{(1)}}{\partial x_1} \right), \quad t_{j-1} \leq t \leq t_j, \quad (x_1, x_2) \in G; \quad (7)$$

$$\frac{\partial C_{(2)}^T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_2} \left( D(\chi_{(2)}) \frac{\partial(\tilde{C}_{(2)}C_{(2)})}{\partial x_2} + \frac{\tilde{C}_{(2)}C_{(2)}}{\chi_{(2)}} \frac{\partial \chi_{(2)}}{\partial x_2} \right), \quad t_{j-1} \leq t \leq t_j, \quad (x_1, x_2) \in G. \quad (8)$$

Уравнения (7) и (8) связаны следующими соотношениями:

$$C_{(1)} \Big|_{t=t_{j-1}} = C_{(2)} \Big|_{t=t_{j-1}}, \quad j = 2, 3, \dots, j_0; \quad C_{(2)} \Big|_{t=t_{j-1}} = C_{(1)} \Big|_{t=t_j}, \quad j = 1, 2, \dots, j_0; \\ C_{(1)}^T \Big|_{t=0} = C_0(x_1, x_2).$$

Величины  $\chi_{(1)}$  и  $\chi_{(2)}$  определяются аналогично соотношению (3).

Одномерные задачи (7) решаются вдоль прямых  $x_2 = x_{2,i_2}$ ,  $i_2 = 0, 1, \dots, N_2$ , а задачи (8) – вдоль прямых  $x_1 = x_{1,i_1}$ ,  $i_1 = 0, 1, \dots, N_1$ . Краевые условия для уравнения (7) имеют вид

$$D(\chi_{(1)}) \frac{\partial(\tilde{C}_{(1)}C_{(1)})}{\partial x_1} + \frac{\tilde{C}_{(1)}C_{(1)}}{\chi_{(1)}} \frac{\partial \chi_{(1)}}{\partial x_1} = 0, \quad t_{j-1} \leq t \leq t_j, \quad (x_1, x_2) \in \Gamma_\nu, \nu = 1, 3. \quad (9)$$

Для уравнения (8) строим аналогичные краевые соотношения:

$$D(\chi_{(2)}) \frac{\partial(\tilde{C}_{(2)}C_{(2)})}{\partial x_2} + \frac{\tilde{C}_{(2)}C_{(2)}}{\chi_{(2)}} \frac{\partial \chi_{(2)}}{\partial x_2} = 0, \quad t_{j-1} \leq t \leq t_j, \quad (x_1, x_2) \in \Gamma_\nu, \nu = 2, 4. \quad (10)$$

Уравнения (7) и (8) решаются совместно с уравнениями для дефектов

$$\sum_{k=1}^2 \left( \frac{\partial}{\partial x_k} d(\chi_{(m)}) \frac{\partial \tilde{C}_{(m)}}{\partial x_k} + \psi_1(x_1, x_2) \tilde{C}_{(m)} \right) - \psi_2(\chi_{(m)}) \tilde{C}_{(m)} + \psi_3(x_1, x_2) = 0, \quad m = 1, 2, \quad (11)$$

и с соответствующими краевыми условиями

$$\alpha_1 \left( d(\chi_{(m)}) \frac{\partial \tilde{C}_{(m)}}{\partial \mathbf{n}} + \psi_1(x_1, x_2) \tilde{C}_{(m)} \right) + \alpha_2 \tilde{C}_{(m)} = \alpha_3, \quad m = 1, 2. \quad (12)$$

В качестве приближенного решения задачи (1)–(6) для  $t = t_j, j = 1, 2, \dots, j_0$  в соответствии с теорией локально-одномерного метода [13] берем функции  $C_{(2)}$  и  $\tilde{C}_{(2)}$ .

Пусть  $y(m), z(m), \tilde{y}(m), m = 1, 2$  – сеточные (приближенные) значения функций  $C_{(m)}, \chi(m), \tilde{C}_{(m)}, m = 1, 2$ , соответственно, определенные в узлах сетки  $\omega = \omega_\tau \times \omega_h$ .

Для произвольной сеточной функции  $\varphi_{i_1, i_2}^j$ , заданной на сетке  $\omega$ , введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \varphi_{\bar{t}} \Big|_{i_1, i_2}^j &= \left( \varphi_{i_1, i_2}^j - \varphi_{i_1, i_2}^{j-1} \right) / \tau_j, \quad i_1 = 0, 1, \dots, N_1, \quad i_2 = 0, 1, \dots, N_2, \quad j = 1, 2, \dots, j_0; \\ \varphi_{x_\beta, i_\beta} &= (\varphi_{i_\beta+1} - \varphi_{i_\beta}) / h_{\beta, i_\beta}, \quad i_\beta = 0, 1, \dots, N_\beta - 1, \quad \beta = 1, 2; \\ \varphi_{\bar{x}_\beta, i_\beta} &= (\varphi_{i_\beta} - \varphi_{i_\beta-1}) / h_{\beta, i_\beta}, \quad i_\beta = 1, 2, \dots, N_\beta, \quad \beta = 1, 2; \\ \varphi_{x_\beta, i_\beta}^0 &= 0.5(\varphi_{x_\beta, i_\beta} + \varphi_{\bar{x}_\beta, i_\beta}), \quad i_\beta = 1, 2, \dots, N_\beta - 1, \quad \beta = 1, 2; \\ \varphi_{\bar{x}_\beta, i_\beta} &= (\varphi_{i_\beta+1} - \varphi_{i_\beta}) / \bar{h}_{\beta, i_\beta}, \quad \bar{h} = 0.5(h_{\beta, i_\beta+1} + h_{\beta, i_\beta}), \quad i_\beta = 0, 1, \dots, N_\beta - 1, \quad \beta = 1, 2. \end{aligned}$$

Здесь второй фиксированный индекс по пространству и верхний индекс по времени опущены.

С помощью интегроинтерполяционного метода [13] построим разностные схемы для дифференциальных условий (7)–(12). На сетке  $\omega$  для  $i_2 = 0, 1, 2, \dots, N_2$  получаем следующие разностные уравнения:

$$\begin{aligned} \left( C_{(1)}^T(z(1), y(1)) \Big|_{\bar{t}} \Big|_{i_1}^j \right) &= \sigma \left( \left( a_1(z(1)) \bar{y}(1) \bar{x}_1 + \frac{\bar{y}(1)}{z(1)} z(1) \bar{x}_1 \right) \Big|_{\bar{x}_1} \right) \Big|_{i_1}^j + \\ + (1 - \sigma) &\left( \left( a_1(z(1)) \bar{y}(1) \bar{x}_1 + \frac{\bar{y}(1)}{z(1)} z(1) \bar{x}_1 \right) \Big|_{\bar{x}_1} \right) \Big|_{i_1}^{j-1}, \quad i_1 = 0, 1, \dots, N_1 - 1, \quad j = 1, 2, \dots, j_0, \quad 0 < \sigma \leq 1; \quad (13) \\ \bar{y}(1) \Big|_{i_1, i_2} &= (\tilde{y}(1) y(1)) \Big|_{i_1, i_2}, \quad i_1 = 0, 1, \dots, N_1 - 1. \end{aligned}$$

Используя дифференциальное уравнение (7), аппроксимируем условие (9) на границе  $\Gamma_1$  соотношением

$$\begin{aligned} 0,5 h_{1,1} \left( C_{(1)}^T(z(1), y(1)) \Big|_{\bar{t}} \Big|_{i_1=0}^j \right) &= \sigma \left( \left( a_1(z(1)) \bar{y}(1) \bar{x}_1 \right) \Big|_{i_1=1}^j + \left( \frac{\bar{y}(1)}{z(1)} z(1) x_1 \right) \Big|_{i_1=0}^j \right) + \\ + (1 - \sigma) &\left( \left( a_1(z(1)) \bar{y}(1) \bar{x}_1 \right) \Big|_{i_1=1}^{j-1} + \left( \frac{\bar{y}(1)}{z(1)} z(1) x_1 \right) \Big|_{i_1=0}^{j-1} \right), \quad j = 1, 2, \dots, j_0, \quad 0 < \sigma \leq 1. \end{aligned} \quad (14)$$

На границе  $x_1 = l_{x_1}$  аналогично получаем

$$\begin{aligned}
& -0,5 h_{1,N_1} \left( C_{(1)}^T(z(1), y(1)) \right) \Big|_{i_1=N_1}^j = \sigma \left( a_1(z(1)) \bar{y}(1) \bar{x}_1 \Big|_{i_1=N_1}^j + \left( \frac{\bar{y}(1)}{z(1)} z(1) \bar{x}_1 \right) \Big|_{i_1=N_1}^j \right) + \\
& + (1-\sigma) \left( a_1(z(1)) \bar{y}(1) \bar{x}_1 \Big|_{i_1=N_1}^{j-1} + \left( \frac{\bar{y}(1)}{z(1)} z(1) \bar{x}_1 \right) \Big|_{i_1=N_1}^{j-1} \right), \quad j=1,2,\dots,j_0, \quad 0 < \sigma \leq 1.
\end{aligned} \tag{15}$$

В соотношениях (13)–(15) сеточные функции  $a_1(z(1))$  заданы следующим образом:

$$\begin{aligned}
a_1(z(1)(x_{i_1}, x_{i_2}, t_j)) &= 0,5(D(z(1)(x_{i_1}, x_{i_2}, t_j)) + D(z(1)(x_{i_1-1}, x_{i_2}, t_j))) \\
i_1 &= 1, 2, \dots, N_1, \quad i_2 = 0, 1, \dots, N_2, \quad j = 0, 1, \dots, j_0.
\end{aligned}$$

При вычислениях полагаем, как правило,  $\sigma = 0,5$  либо 1. При  $\sigma = 1$  получаем схему с опережением, при  $\sigma = 0,5$  – симметричную схему Кранка – Никольсона.

Аналогично дифференциальное уравнение (8) на сетке  $\omega$  для  $i_1 = 0, 1, \dots, N_1$  аппроксимируем разностными соотношениями вида

$$\begin{aligned}
& \left( C_{(2)}^T(z(2), y(2)) \right) \Big|_{i_2}^j = \sigma \left( \left( a_2(z(2)) \bar{y}(2) \bar{x}_2 + \frac{\bar{y}(2)}{z(2)} z(2) \bar{x}_2 \right) \Big|_{\bar{x}_2} \right) \Big|_{i_2}^j + \\
& + (1-\sigma) \left( \left( a_2(z(2)) \bar{y}(2) \bar{x}_2 + \frac{\bar{y}(2)}{z(2)} z(2) \bar{x}_2 \right) \Big|_{\bar{x}_2} \right) \Big|_{i_2}^{j-1}, \quad i_2 = 1, \dots, N_2 - 1, \quad j = 1, 2, \dots, j_0, \quad 0 < \sigma \leq 1.
\end{aligned} \tag{16}$$

Здесь  $\bar{y}(2) \Big|_{i_1, i_2} = (\tilde{y}(2) y(2)) \Big|_{i_1, i_2}$ ,  $i_2 = 0, 1, \dots, N_2$ .

Для краевого условия (10) и при  $(x_1, x_2) \in \Gamma_2$  получаем

$$\begin{aligned}
& 0,5 h_{2,1} \left( C_{(2)}^T(z(2), y(2)) \right) \Big|_{i_2=0}^j = \sigma \left( a_2(z(2)) \bar{y}(2) \bar{x}_2 \Big|_{i_2=1}^j + \left( \frac{\bar{y}(2)}{z(2)} z(2) \bar{x}_2 \right) \Big|_{i_2=0}^j \right) + \\
& + (1-\sigma) \left( a_2(z(2)) \bar{y}(2) \bar{x}_2 \Big|_{i_2=1}^{j-1} + \left( \frac{\bar{y}(2)}{z(2)} z(2) \bar{x}_2 \right) \Big|_{i_2=0}^{j-1} \right), \quad j = 1, 2, \dots, j_0, \quad 0 < \sigma \leq 1.
\end{aligned} \tag{17}$$

Соответственно для  $(x_1, x_2) \in \Gamma_4$  имеем

$$\begin{aligned}
& -0,5 h_{2,N_2} \left( C_{(2)}^T(z(2), y(2)) \right) \Big|_{i_2=N_2}^j = \sigma \left( a_2(z(2)) \bar{y}(2) \bar{x}_2 + \frac{\bar{y}(2)}{z(2)} z(2) \bar{x}_2 \right) \Big|_{i_2=N_2}^j + \\
& + (1-\sigma) \left( a_2(z(2)) \bar{y}(2) \bar{x}_2 + \frac{\bar{y}(2)}{z(2)} z(2) \bar{x}_2 \right) \Big|_{i_2=N_2}^{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots, j_0, \quad 0 < \sigma \leq 1.
\end{aligned} \tag{18}$$

В соотношениях (16)–(18) сеточную функцию  $a_2(z(2))$  определяем следующим образом:

$$a_2(z(2)(x_{i_1}, x_{i_2}, t_j)) = 0,5(D(z(2)(x_{i_1}, x_{i_2}, t_j)) + D(z(2)(x_{i_1}, x_{i_2-1}, t_j))),$$

$$i_1 = 0, 1, \dots, N_1, \quad i_2 = 1, 2, \dots, N_2, \quad j = 0, 1, \dots, j_0.$$

Разностные соотношения (13)–(15) и (16)–(18) дополняем алгебраическими нелинейными уравнениями

$$z(m) - \frac{1}{2n_e} \left( y(m) - K z(m)^{P_1} y(m)^{P_2} - C_B + \sqrt{\left( y(m) - K z(m)^{P_1} y(m)^{P_2} - C_B \right)^2 + 4n_e^2} \right) \Bigg|_{i_1, i_2}^j = 0, \quad (19)$$

где  $m = 1, 2$ ;  $j = 0, 1, \dots, j_0$ ;  $i_1 = 0, 1, \dots, N_1$ ;  $i_2 = 0, 1, \dots, N_2$ .

Задачи (13)–(15) и (16)–(18) связаны условиями

$$y(1) \Big|_{t=t_{j-1}} = y(2) \Big|_{t=t_{j-1}}, \quad y(2) \Big|_{t=t_{j-1}} = y(1) \Big|_{t=t_j}, \quad y_{(1)}^T \Big|_{t=0} = C_0(x_1, x_2).$$

Согласно введенным соотношениям величины  $y(1), i_1, i_2 \Big|_{t=0}$  и  $z(1), i_1, i_2 \Big|_{t=0}$  определяются из системы нелинейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} y(1) + K z(1)^{P_1} y(1)^{P_2} = C_0 \Big|_{i_1, i_2}, \\ z(1) - \frac{1}{2n_e} \left( y(1) - K z(1)^{P_1} y(1)^{P_2} - C_B + \sqrt{\left( y(1) - K z(1)^{P_1} y(1)^{P_2} - C_B \right)^2 + 4n_e^2} \right) \Big|_{i_1, i_2} = 0, \end{cases} \quad (20)$$

где  $i_1 = 0, 1, \dots, N_1$ ,  $i_2 = 0, 1, \dots, N_2$ .

На сетке  $\omega_h$  уравнение (11) аппроксимируем системой разностных соотношений

$$\sum_{k=1}^2 \left( \left( b_k(z(m)) \tilde{y}(m) \bar{x}_k \right)_{\bar{x}_k} + \psi_1(x_1, x_2) \tilde{y}(m) \Big|_{x_k}^0 - \psi_2(z(m)) \tilde{y}(m) + \psi_3(x_1, x_2) \right) \Big|_{i_1, i_2}^j = 0, \quad (21)$$

$$m = 1, 2; \quad j = 0, 1, \dots, j_0; \quad i_1 = 1, 2, \dots, N_1 - 1; \quad i_2 = 1, 2, \dots, N_2 - 1,$$

ããã

$$b_1(z(m)(x_{i_1}, x_{i_2}, t_j)) = 0,5 \left( d(z(m)(x_{i_1}, x_{i_2}, t_j)) + d(z(m)(x_{i_1-1}, x_{i_2}, t_j)) \right),$$

$$i_1 = 1, 2, \dots, N_1; \quad i_2 = 0, 1, \dots, N_2; \quad j = 0, 1, \dots, j_0;$$

$$b_2(z(m)(x_{i_1}, x_{i_2}, t_j)) = 0,5 \left( d(z(m)(x_{i_1}, x_{i_2}, t_j)) + d(z(m)(x_{i_1}, x_{i_2-1}, t_j)) \right),$$

$$i_1 = 0, 1, \dots, N_1, \quad i_2 = 1, 2, \dots, N_2, \quad j = 0, 1, \dots, j_0.$$

Для наглядности дальнейшего изложения численного метода полагаем  $\alpha = 0$ . Следовательно, краевые условия для уравнения (21) примут вид

$$\tilde{y}(m) = \Lambda(x_1, x_2) \Big|_{(x_1, x_2) \in \Gamma}, \quad m = 1, 2, \quad (22)$$

где функция  $\Lambda(x_1, x_2)$  определяется очевидным образом величинами  $\alpha_2$  и  $\alpha_3$ .

Разностные соотношения (13)–(22) представляют собой для каждого  $j = 1, 2, \dots, j_0$  замкнутую систему нелинейных алгебраических уравнений относительно сеточных функций  $y(m)$ ,  $\tilde{y}(m)$ ,  $z(m)$ ,  $m = 1, 2$ , определенных на сетке  $\omega_h$ . Значения данных функций получаем с помощью итерационных процессов.

В случае нелинейного уравнения (13) при  $i_2 = 0, 1, \dots, N_2$  строим следующий итерационный процесс:

$$\begin{aligned} & \left( C_{(1)}^T \begin{pmatrix} s & s \\ z_{(1)} & y_{(1)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 + p_2 \gamma_{(1)} & s p_2^{-1} \\ s & y_{(1)} - y_{(1)} \end{pmatrix} \right) \Big|_{i_1}^{s+1, s} \Big|_{i_1}^j = C_{(1)}^T \begin{pmatrix} z_{(1)} & y_{(1)} \end{pmatrix} \Big|_{i_1}^{j-1} + \\ & + \tau_j \sigma \left( \begin{pmatrix} a_1(z_{(1)}) \tilde{y}_{(1)} y_{(1)} \bar{x}_1 + \frac{s}{z_{(1)}} \frac{\tilde{y}_{(1)}}{s} z_{(1)} \bar{x}_1 \\ z_{(1)} \end{pmatrix} \right) \Big|_{\bar{x}_1}^j + \tau_j (1 - \sigma) \left( \begin{pmatrix} a_1(z_{(1)}) \bar{y}_{(1)} \bar{x}_1 + \frac{\bar{y}_{(1)}}{z_{(1)}} z_{(1)} \bar{x}_1 \\ z_{(1)} \end{pmatrix} \right) \Big|_{\bar{x}_1}^{j-1}. \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь  $\gamma_{(1)} = K z_{(1)}$ ;  $\tilde{y}_{(1)} = \tilde{y}_{(1)} y_{(1)}$ ;  $i_1 = 1, 2, \dots, N_1 - 1$ ;  $s = 0, 1, 2, \dots$ .

Для краевых условий (14) и (15) соответственно получаем

$$\begin{aligned} & \xi_{1,j} \left( C_{(1)}^T \begin{pmatrix} s & s \\ z_{(1)} & y_{(1)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 + p_2 \gamma_{(1)} & s p_2^{-1} \\ s & y_{(1)} - y_{(1)} \end{pmatrix} \right) \Big|_{i_1=0}^j = \\ & = \xi_{1,j} C_{(1)}^T \begin{pmatrix} z_{(1)} & y_{(1)} \end{pmatrix} \Big|_{i_1=0}^{j-1} + \sigma \left( \begin{pmatrix} a_1(z_{(1)}) \tilde{y}_{(1)} y_{(1)} \bar{x}_1 \\ z_{(1)} \end{pmatrix} \Big|_{i_1=1}^j + \begin{pmatrix} \frac{s}{z_{(1)}} \frac{\tilde{y}_{(1)}}{s} z_{(1)} \bar{x}_1 \\ z_{(1)} \end{pmatrix} \Big|_{i_1=0}^j \right) + \\ & + (1 - \sigma) \left( \begin{pmatrix} a_1(z_{(1)}) \bar{y}_{(1)} \bar{x}_1 \\ z_{(1)} \end{pmatrix} \Big|_{i_1=1}^{j-1} + \begin{pmatrix} \frac{\bar{y}_{(1)}}{z_{(1)}} z_{(1)} \bar{x}_1 \\ z_{(1)} \end{pmatrix} \Big|_{i_1=0}^{j-1} \right), \end{aligned} \quad (24)$$

где  $\xi_{1,j} = 0,5h_{1,1} / \tau_j$ ,  $s = 0, 1, 2, \dots$ ;

$$\begin{aligned} & \xi_{N_1,j} \left( C_{(1)}^T \begin{pmatrix} s & s \\ z_{(1)} & y_{(1)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 + p_2 \gamma_{(1)} & s p_2^{-1} \\ s & y_{(1)} - y_{(1)} \end{pmatrix} \right) \Big|_{i_1=N_1}^j = \xi_{1,j} C_{(1)}^T \begin{pmatrix} z_{(1)} & y_{(1)} \end{pmatrix} \Big|_{i_1=N_1}^{j-1} + \\ & + \sigma \left( \begin{pmatrix} a_1(z_{(1)}) \tilde{y}_{(1)} y_{(1)} \bar{x}_1 + \frac{s}{z_{(1)}} \frac{\tilde{y}_{(1)}}{s} z_{(1)} \bar{x}_1 \\ z_{(1)} \end{pmatrix} \Big|_{i_1=N_1}^j + (1 - \sigma) \left( \begin{pmatrix} a_1(z_{(1)}) \bar{y}_{(1)} \bar{x}_1 + \frac{\bar{y}_{(1)}}{z_{(1)}} z_{(1)} \bar{x}_1 \\ z_{(1)} \end{pmatrix} \Big|_{i_1=N_1}^{j-1} \right). \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь  $\xi_{N_1,j} = -0,5h_{1,N_1} / \tau_j$ ,  $s = 0, 1, 2, \dots$ .



Решение нелинейных уравнений (16)–(18) находим с помощью итерационных процедур, аналогичных соотношениям (23)–(25), а для уравнения (19) получаем итерационное соотношение

$$z^{s+1}(m) - \frac{1}{2ne} \left( y^{s+1}(m) - K z^{s+1P_1}(m) y^{s+1P_2}(m) - C_B + \sqrt{\left( y^{s+1}(m) - K z^{s+1P_1}(m) y^{s+1P_2}(m) - C_B \right)^2 + 4n_e^2} \right) \Big|_{i_1, i_2}^j = 0, \quad (26)$$

$m = 1, 2, \quad j = 0, 1, \dots, j_0, \quad i_1 = 0, 1, \dots, N_1, \quad i_2 = 0, 1, \dots, N_2, \quad s = 0, 1, 2, \dots$

Многомерную задачу (21), (22) решаем с помощью следующей итерационной процедуры:

$$\sum_{k=1}^2 \left( \left( b_k^{s+1}(z(m)) \tilde{y}^{s+1}(m) \bar{x}_k \right)_{\tilde{x}_k} + \psi_1(x_1, x_2) \tilde{y}^{s+1}(m) x_k^0 - \psi_2(z(m)) \tilde{y}^{s+1}(m) + \psi_3(x_1, x_2) \right) \Big|_{i_1, i_2}^j = 0, \quad (27)$$

где  $\tilde{y}^{s+1}(m) = \Lambda(x_1, x_2) \Big|_{(x_1, x_2) \in \Gamma}; \quad m = 1, 2, \quad s = 0, 1, 2, \dots, \quad j = 0, 1, \dots, j_0, \quad i_1 = 1, 2, \dots, N_1 - 1, \quad i_2 = 1, 2, \dots, N_2 - 1.$

Численное решение задачи (1)–(6) в соответствии с построенным методом находим по следующему алгоритму:

1. С помощью метода итераций решаем алгебраическую систему уравнений (20), определяя функции  $z(1), y(1)$  при  $t = 0$  во всех узлах сетки  $\omega_h$ . Для решения данной задачи целесообразно использовать  $N$  процессоров одновременно,  $N = (N_1 + 1) \times (N_2 + 1)$ . В этом случае число процессоров не зависит от числа итераций, необходимых для решения системы. Если число  $N$  превышает число процессоров, доступных для решения задачи, то следует вычисления, предназначенные нескольким процессорам, объединить в более крупные блоки.

2. По найденным значениям  $z(1)$  при  $t = 0$  определяем коэффициенты уравнения (21) и преобразуем его к виду, позволяющему решать полученную задачу методом матричной прогонки [14]. При этом для решения в соответствии с методикой, предложенной в [15], можно использовать  $N_1 + 1$  процессор.

3. Предполагаем, что известны значения  $y(1), z(1), \tilde{y}(1)$  на сетке  $\omega_h$  при  $t = t_{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots, j_0$  и что  $y^{s,j}(1)_{i_1, i_2} = y^{j-1}(1)_{i_1, i_2}, \quad z^{s,j}(1)_{i_1, i_2} = z^{j-1}(1)_{i_1, i_2}, \quad \tilde{y}^{s,j}(1)_{i_1, i_2} = \tilde{y}^{j-1}(1)_{i_1, i_2},$   
 $i_1 = 0, 1, \dots, N_1, \quad i_2 = 0, 1, \dots, N_2$  для  $s = 0$ .

4. Полагаем, что  $s = 0$ , и находим коэффициенты уравнений (23)–(25).

5. Используя одновременно  $(N_2 + 1)$  процессоров методом скалярной прогонки [13] вдоль направления  $x_1$  для значений  $x_{i_2} = i_2 h_2, \quad i_2 = 0, 1, 2, \dots, N_2$ , из разностных соотношений

$$(23)–(25) \text{ определяем } y_{(1)_{i_1, i_2}}^{s,j}, \quad i_1 = 0, 1, \dots, N_1, \quad i_2 = 0, 1, \dots, N_2 \text{ для } s = 1.$$

6. Полагаем, что в уравнении (26)  $s = 0, \quad m = 1$  и методом итераций находим  $z_{(1)_{i_1, i_2}}^{s,j},$   
 $i_1 = 0, 1, \dots, N_1, \quad i_2 = 0, 1, \dots, N_2$  для  $s = 1$ .

7. По найденным значениям  $z_{(1)i_1, i_2}^s$ ,  $s=1$ , находим коэффициенты уравнения (27) и аналогично этапу 2 из соотношений (27), (28) находим значения  $\tilde{y}_{(1)i_1, i_2}^s$ ,  $i_1 = 0, 1, \dots, N_1$ ,  $i_2 = 0, 1, \dots, N_2$  для  $s=1$ . На этом один внутренний итерационный цикл закончен.

8. Далее, полагая последовательно  $s=1, 2, \dots$ , выполняем этапы 4–7. Учитывая, что  $y_{(m)} \gg 1$ ,  $m=1, 2$ , итерирование ведем до выполнения условия

$$\left| y_{(1)i_1, i_2}^{s+1} - y_{(1)i_1, i_2}^s \right| \leq \varepsilon \left| y_{(1)i_1, i_2}^s \right|, \quad i_1 = 0, 1, \dots, N_1, \quad i_2 = 0, 1, \dots, N_2, \quad s = 1, 2, 3, \dots, \quad (29)$$

где  $\varepsilon$  – эмпирический параметр,  $\varepsilon \ll 1$ .

За решение уравнений (13)–(15)  $y_{(1)i_1, i_2}^j$ ,  $i_1 = 0, 1, \dots, N_1$ ,  $i_2 = 0, 1, \dots, N_2$ , на  $j$ -м слое принимаем последнее итерационное значение  $y_{(1)i_1, i_2}^{s+1}$ ,  $i_1 = 0, 1, \dots, N_1$ ,  $i_2 = 0, 1, \dots, N_2$ , удовлетворяющее условию (29).

9. Полагаем  $y_{(2)}^{j-1} = y_{(1)}^j$ ,  $z_{(2)}^{j-1} = z_{(1)}^j$ ,  $\tilde{y}_{(2)}^{j-1} = \tilde{y}_{(1)}^j$ ,  $j=1, 2, \dots, j_0$ , для  $i_1 = 0, 1, \dots, N_1$ ,  $i_2 = 0, 1, \dots, N_2$  и аналогично этапам 3–8 определяем  $y_{(2)}^j$ ,  $j=1, 2, \dots, j_0$ , на сетке  $\omega_h$ .

За приближенное решение задачи (1)–(6) (распределение примесей) на каждом временном слое берем численное значение  $y_{(2)}$ .

При проведении вычислительных экспериментов, учитывая ожидаемый характер поведения решения, пространственная сетка  $\omega_h$  строится со сгущением к прямой  $x_1 = 0$ . Расчеты целесообразно проводить с различными значениями шагов по пространству и времени, варьируя величины  $\varepsilon$  и  $\sigma$ . Получение близких по значениям решений при различных параметрах счета позволит оптимизировать параметры счета и выбрать одно из найденных решений в качестве искомого численного решения задачи (1)–(6). Контроль вычислений осуществляется проверкой выполнения условия

$$\iint_G y_{(2)}^T(x_1, x_2, t^j) dx_1 dx_2 = \iint_G C_0(x_1, x_2) dx_1 dx_2, \quad j = 1, 2, \dots, j_0,$$

где  $y_{(2)}^T = y_{(2)} + K z_{(2)}^1 y_{(2)}^2$ .

### Заключение

Ввиду большого объема вычислений, необходимого для решения задачи, предлагаемый метод целесообразно использовать на многопроцессорных ЭВМ. Основные вычисления приходится на решение систем линейных алгебраических уравнений методом итераций и методом матричной прогонки, которые хорошо распараллеливаются. Кроме предложенных путей, для решения полученных систем уравнений можно использовать и другие параллельные алгоритмы. Изложенный в данной работе подход естественным образом обобщается на трехмерные задачи и задачи с криволинейной областью моделирования. Рас-

смаатриваемая модель диффузии примесей достаточно точно отражает формирование активных областей СБИС при низких энергиях имплантации и коротком термическом отжиге, что подтвердили расчеты, проведенные в статьях [9, 10]. Данная современная технология создания элементов ультрабольших интегральных схем в настоящее время является наиболее перспективной при разработке быстродействующих микросхем с минимальным энергопотреблением. Однако проведение полномасштабных численных экспериментов в многомерном случае в настоящее время затруднительно в силу недостаточной информации о параметрах, входящих в модель (1)–(6). Определение данных многофакторных параметров требует проведения разнообразных дорогостоящих экспериментов. Получаемые при этом результаты носят закрытый характер, и в настоящее время некоторые из них еще не опубликованы.

### Список литературы

1. Whelan, S. Implant temperature dependence of transient-enhanced diffusion in silicon (100) implanted with low-energy arsenic ions / S. Whelan [et al.] // *Materials Science in Semiconductor Processing*. – 2000. – No. 3. – P. 285–290.
2. Vandervorst, W. Errors in near-surface and interfacial profiling of boron and arsenic / W. Vandervorst [et al.] // *Applied Surface Science*. – 2004. – Vol. 231–232. – P. 618–631.
3. Buyuklimanli, T.H. Improved near surface characterization of shallow arsenic distribution by SIMS depth profiling / T.H. Buyuklimanli, J.W. Marino, S.W. Novak // *Applied Surface Science*. – 2004. – Vol. 231–232. – P. 636–639.
4. Girginoudi, D. Studies of ultra shallow  $n^+p$  junctions formed by low-energy As-implantation / D. Girginoudi [et al.] // *Materials Science and Engineering B* 114-115. – 2004. – P. 381–385.
5. Solmi, S. Transient enhanced diffusion of arsenic in silicon / S. Solmi [et al.] // *Journal of Applied Physics*. – 2003. – Vol. 94, No. 8. – P. 4950–4955.
6. La Via, F. Precipitation of arsenic diffused into silicon from a  $TiSi_2$  source / F. La Via [et al.] // *Journal of Applied Physics*. – 1991. – Vol. 69, No. 2. – P. 726–731.
7. Lamrani, Y. Direct evidence of the recombination of silicon interstitial atoms at the silicon surface / Y. Lamrani [et al.] // *Nuclear Instrum. and Meth. in Phys. Res.* – 2004. – Vol. B 216. – P. 281–285.
8. Fedotov, K. A set of equations of stress-mediated evolution of the nonequilibrium dopant-defect system in semiconductor crystals / K. Fedotov, O.I. Velichko, V.A. Dobrushkin // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2004. – Vol. 382, Issue 1–2. – P. 283–287.
9. Velichko, O.I. Simulation of arsenic diffusion during rapid thermal annealing of silicon layers doped with low-energy high-dose ion implantation / O.I. Velichko [et al.] // *Сб. материалов 6-й Междунар. конф. ВИТТ–2005*. – Минск, 2005. – С. 197–199.
10. Komarov, F.F. Modeling of diffusion of As implanted in Si in the near-surface region / F.F. Komarov [et al.] // *Proceedings of the IV International Conference «New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation»*. – Zakopane, Poland, 2005. – P. 68–70.
11. Velichko, O.I. Simulation of coupled diffusion of impurity atoms and point defects under nonequilibrium conditions in local domain / O.I. Velichko [et al.] // *Journal of Computational Physics*. – 2002. – Vol. 178. – P. 196–205.
12. Solmi, S. High concentration diffusivity and clustering of arsenic and phosphorus in silicon / S. Solmi, D. Nobile // *Journal of Applied Physics*. – 1998. – Vol. 83. – No. 5. – P. 2484–2490.
13. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1977. – 656 с.
14. Самарский, А.А. Методы решения сеточных уравнений / А.А. Самарский, Е.С. Николаев. – М.: Наука, 1978. – 592 с.

15. Likhoded, N.A. Processor Arrays for Solving Nonstationary Systems of Equations of Mathematical Physics / N.A. Likhoded, A.A. Tiunchik, V.A. Tsurko // Engineering Simulation. – 1995. – Vol. 13. – P. 259–270.

Поступила 06.05.07

<sup>1</sup>Институт математики НАН Беларуси,  
Минск, Сурганова, 11  
e-mail: zayats@im.bas-net.by,  
vtsurko@im.bas-net.by

<sup>2</sup>Объединенный институт проблем  
информатики НАН Беларуси,  
Минск, Сурганова, 6  
e-mail: witas@newman.bas-net.by

**G.M. Zayats, V.I. Stsetsurenka, V.A. Tsurko**

**ALGORITHMS FOR SIMULATION OF ACTIVE DOMAINS  
OF INTEGRATED CIRCUIT ELEMENTS AND THEIR REALIZATION  
ON PARALLEL COMPUTING SYSTEMS**

A model for making active domains of integrated circuit elements by thermal diffusion of admixtures in semi-conductors is considered. The model takes into account non-linearity, multidimensionality, influence on diffusion of point effects, cluster generation, and electrons migration. The algorithms for numerical solution of differential equations system which are based on the use of finite-difference methods and are efficient for parallel computing systems are developed.